

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение  
высшего образования  
«СИБИРСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

Институт инженерной физики и радиоэлектроники  
Кафедра Теоретической физики и волновых явлений

УТВЕРЖДАЮ

Заведующий кафедрой

\_\_\_\_\_ С.Г. Овчинников

« \_\_\_\_\_ » \_\_\_\_\_ 20 \_\_\_\_ г.

**МАГИСТЕРСКАЯ ДИССЕРТАЦИЯ**

Поляроны малого радиуса и переход Пайерлса в квазиодномерных системах

03.04.02 Физика

03.04.02.05 Теоретическая и математическая физика

Научный руководитель	_____	проф. кафедры ТФиВЯ, С.Г. Овчинников
	подпись, дата	д.ф.-м.н.
Выпускник	_____	А.Э. Зарубин
	подпись, дата	
Рецензент	_____	в.н.с лаборатории ТФ Д.М. Дзедзисашвили
	подпись, дата	ИФ СО РАН, д.ф.-м.н.
Нормоконтролер	_____	Н.Н. Паклин
	подпись, дата	

Красноярск 2017

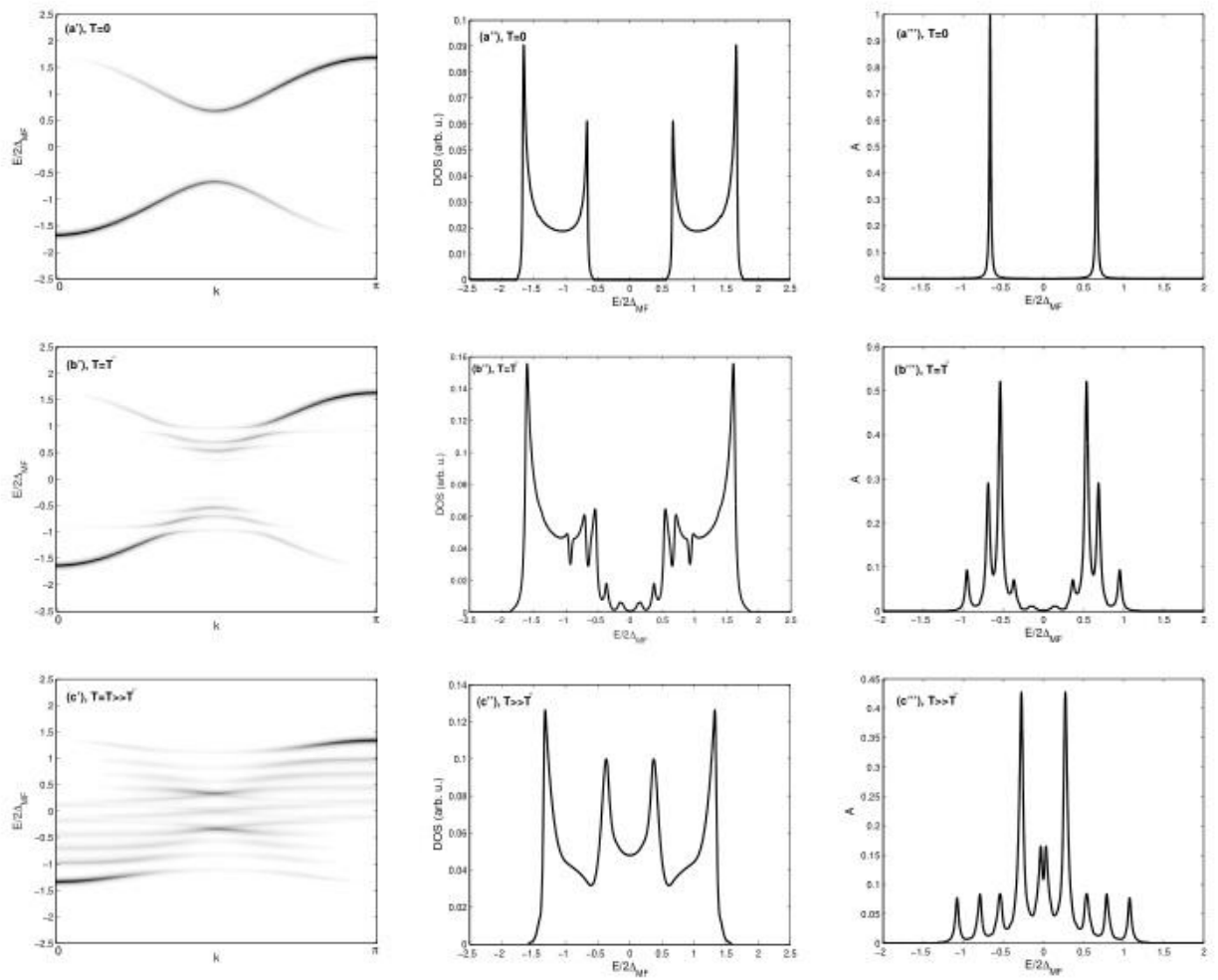
## Введение

В связи с исследованиями высокотемпературных сверхпроводников, различных мультиферроиков, манганитов с колоссальным магнитосопротивлением и квазиодномерных (q1D) систем, наблюдается повышенный интерес к теории поляронов. Данная обширная область физики твердого тела рассматривает эффект второго порядка теории возмущений по электрон-фононному взаимодействию (ЭФВ) – изменение энергетического спектра свободных носителей заряда. Носителем заряда в данном случае называется полярон – квазичастица, состоящая из движущегося по решетке электрона и сопровождающего его облака фононов [1]. В ряде случаев при наличии ЭФВ электронная структура системы демонстрирует расщепление зон на поляронные подзоны, а в плотности состояний наблюдается, так называемое, явление псевдощели, это провал вблизи уровня Ферми в металлическом состоянии системы. Последовательное теоретическое описание природы псевдощелевого поведения остается одной из главных проблем физики квазиодномерных соединений.

В данной работе рассматривается упрощенная одномерная модель с псевдощелевым поведением. Приводится расчет электронной структуры для различных температур и различной величины электрон-фононного взаимодействия. Обнаружено устойчивое псевдощелевое состояние в случае сильного ЭФВ.

Для расчетов применялись техника Х-операторов Хаббарда и метод обобщенной сильной связи GTB (Generalized Tight Binding), развивающийся в лаборатории физики магнитных явлений ИФ СО РАН [2-4]. Метод GTB был выбран, так как он позволяет получить структуру в многочастичной задаче при любых температурах и различных значениях электрон-фононного взаимодействия. И актуальность данной работы, таким образом, заключается не только в изучении псевдощелевого поведения, но и в применении метода GTB для подобных задач.

## Пример результатов для сильного электрон-фононного взаимодействия



Изъято 29 страниц.

## Заключение

Была рассмотрена упрощенная одномерная система с наличием электрон-фононного взаимодействия и псевдощелевым поведением. Расчет проводился методом ГТВ, развивающимся в лаборатории физики магнитных явлений ИФ СО РАН. Данный метод подошел для сравнения двух предельных случаев ЭФВ при различных температурах.

Исходя из приведенных выше результатов работы, можно сделать такие выводы:

- рост величины ЭФВ приводит к перераспределению весового вклада базисных состояний в основное состояние системы;
- независимо от величины электрон-фононного взаимодействия основное состояние квазиодномерных систем имеет качественно одинаковый вид — истинная диэлектрическая щель, которая обусловлена дальним порядком ВЗП-типа;
- в квазиодномерных системах со слабым ЭФВ псевдощелевого поведения не наблюдалось, однако замечено слабое проявление поляронного эффекта, который заключается в размытии зоны на поляронные подзоны;
- в случае сильного ЭФВ электронная структура квазиодномерной системы показывает, что наряду с ВЗП-щелью, обуславливающей истинное диэлектрическое основное состояние, существует поляронная щель или щель поляронного происхождения, ответственная за псевдощелевое поведение, устойчивое к росту температуры.

## Список литературы

- 1 Аппель Д. В сб.: Поляроны/Под ред. ЮА Фирсова, 1975.
- 2 S.G. Ovchinnikov, V.V. Val'kov, Hubbard operators in the Theory of Strongly correlated electrons, Imperial College Press, London-Singapore, 2004.
- 3 Ovchinnikov S. G. et al. LDA+ GTB Method for Band Structure Calculations in the Strongly Correlated Materials //Strongly Correlated Systems. – Springer Berlin Heidelberg, 2012. – p.143-171.
- 4 I.A. Makarov, E.I. Shneyder, P.A. Kozlov, S.G. Ovchinnikov, Phys. Rev. B 92, 155143, 2015.
- 5 Булаевский Л. Н. Структурный (пайерлсовский) переход в квазиодномерных кристаллах //Успехи физических наук. – Т. 115.№. 2. – С. 263-300., 1975.
- 6 E.H. Lieb, F.Y. Wu, Phys. Rev. Lett. 20, 1445, 1968.
- 7 N.F. Mott, W.D. Twose, Adv. Phys. 10, 107, 1961.
- 8 Пайерлс Р. Квантовая теория твердых тел //М.: ИЛ., 1956.
- 9 В.Л. Березинский, ЖЭТФ 65, 1251, 1973.
- 10 M. Grioni, S. Pons, E. Frantzeskakis, J. Phys.: Condens. Matter 21, 023201, 2009.
- 11 L. Perfetti, S. Mitrovic, G. Margaritondo, M. Grioni, L. Forro, L. Degiorgi, H. Hochst, Phys. Rev. B 66, 075107, 2002.
- 12 L.Perfetti, H. Berger, A. Reginelli, L. Degiorgi, H. Hochst, J. Voit, G. Margaritondo, and M. Grioni, Phys. Rev. Lett. 87, 216404, 2001.
- 13 Grüner G. The dynamics of charge-density waves //Reviews of Modern Physics, 1988.
- 14 Daixiang Mou, R.M. Konik, A.M. Tsvelik, I. Zaliznyak, and Xingjiang Zhou, Phys. Rev. B 89, 201116(R), 2014.
- 15 C. Tournier-Colletta, L. Moreschini, G. Autes, S. Moser, A. Crepaldi, H. Berger, A.L. Walter, K.S. Kim, A. Bostwick, P. Monceau, E. Rotenberg, O.V. Yazyev, and M. Grioni, Phys. Rev. Lett. 110, 236401, 2013.

- 16 M.V. Sadovskii, Zh. Eksp. Teor. Fiz. 66, 1720, 1974.
- 17 M.V. Sadovskii, Fiz. Tverd. Tela 16, 2504, 1974.
- 18 M.V. Sadovskii, Zh. Eksp. Teor. Fiz. 77, 2070, 1979.
- 19 P.A. Lee, T.M. Rice and P.W. Anderson, Phys. Rev. Lett. 31, 462, 1973.
- 20 J. Schmalian, D. Pines, B. Stojkovic, Phys. Rev. Lett. 80, 3839, 1998.
- 21 J. Schmalian, D. Pines, and B. Stojkovic, Phys. Rev. B 60, 667, 1999.
- 22 Э.З. Кучинский и М.В. Садовский, ЖЭТФ 115, 1765, 1999.
- 23 S.A. Brazovskii Pis'ma v Zh. Eksp. Teor. Fiz. 28, 656, 1978.
- 24 S.A. Brazovskii, I.E. Dzyaloshinski, and S.P. Obukhov, Zh. Eksp. Teor. Fiz. 72, 1550, 1976.